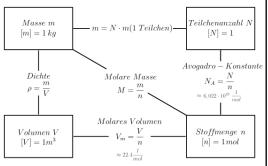
Chemie ZF L. Hoffmann & D. Vermee Ihoffma & dvermee Edited/translated by N. Sendlhofer & C. Leser

nsendlhofer& cleser 29. Dezember 2022

1. Basics

1.1 Unit conversions



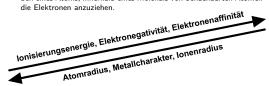
- 1. Energy: $1eV = 1.602 \cdot 10^{-19} J$, 1cal = 4.18J
- 2. **Pressure:** $1Pa=9.892atm=1.0 \cdot 10^{-5}bar=7.5 \cdot 10^{-3}torr$
- 3. Amount of substance: $1 \text{ mol} = 6.022 \cdot 10^{23}$ elementary entities (Avogadro constant)
- 4. Length: $1\text{Å} = 10^{-10} m$
- 5. STP thermodynamics: 25C = 298K, 1bar, 1mol, 1 cal
- 6. STP electrochemistry: 25C = 298K, 1atm, concentration 1M

1.2 Allgemeines

- $\begin{array}{l} \bullet \quad \text{Kinetische Energie: } E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 \\ \bullet \quad \text{Potentielle Energie: } E_{pot} = m \cdot g \cdot \Delta h \\ \end{array}$
- Elektrostatische WW: $E_{el}=\frac{\kappa Q_1 Q_2}{d^3}$ $\kappa=\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$
- Photonenergie: $E_{\gamma} = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda}$
- de-Broglie-Wellenlänge: $\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$ spez. wärmekapazität: $C_s = \frac{q}{m \cdot \Delta T}$

1.3 Trends im Periodensystem

- Ionisierungsenergie: Energie, die nötig ist, um ein Elektron aus der neutral geladenen Atom zu entfernen.
- Elektronenaffinität: Frei werdende Energie, wenn ein neutrales Atom ein Flektron aufnimmt
- Elektronegativität: Die Elektronegativität ist ein Maß für das Bestreben eines Atoms, innerhalb eines Moleküls von benachbarten Atomen die Elektronen anzuziehen



2. Atome

2.1 Quantenmechanik

- Ordnungszahl = #Protonen = #Elektronen
- Massenzahl = Anzahl Protonen + Anzahl Neutronen

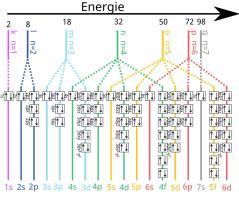
Elektronen haben Teilchen und Welleneigenschaften. Daraus folgt, dass sich Energie und Position eines Elektrons nicht mit der gleichen Genauigkeit bestimmen lassen (Heisenberg'sche Unschärferelation).

Effektive Kernladung: $\vec{Z}_{eff} = \vec{Z} - \vec{S}$

Z = Anzahl Protonen. $S = \text{Anzahl } e^-$ auf innere Bahnen

Innerhalb einer Periode nimmt effektive Kernladung von links nach rechts zu. Daraus folgt, dass stärker an den Kern gebunden sind, der Atomradius nimmt ab

2.2 Orbitale



- Orbitale mit dem gleichen n-Wert heissen Schalen.
- Orbitale mit dem selben n- und l-Werten heissen Unterschalen.
- Jede Schale mit Quantenzahl n hat n Unterschalen.
- Die Drehimpulszahl bestimmt die Form der Orbitale.
- Jede Unterschale hat 2l + 1 Orbitale.

Hauptquantenzahl n: Je grösser n, desto weiter ist das elektron vom Kern entfernt. $n \in [1, 2, 3, 4]$. n bedingt l & m

Drehimpulsquantenzahl l: Bestimmt Form der Orbitale. $l \in [0, n-1]$

Magnetische Quantenzahl m_l : Beschreibt Orientierung des Orbitals im Raum $m_l \in [-l, l]$

Spinnquantenzahl m_s : Zu verstehen als Drehimpuls. Spin up \uparrow . Spindown |

- s-Orbital → Kugelförmig.
- p-Orbital → Hantelförmig.
- d-Orbital → Meistens Vierblättriges Kleeblatt.

Pauli-Prinzip: Jedes Orbital kann von maximal zwei Elektronen besetzt werden (Eins mit Spin-up, eins mit Spin-down).

Hund'sche Regel: Möglichst viele Elektronen haben den gleichen Spin. weswegen es energetisch günstiger ist, wenn alle Orbitale der äussersten Schale gefüllt werden, als wenn die Hälfte dieser Orbitale ganz gefüllt werden

Schale	n	l	Orbitaltyp	m	8	Anzahl der Quantenzustände	
K	1	0	1s	0	±1/2	2 2	
L	2	0	2s	0	±1/2	2 8	
		1	2p	-1 0 +1	+1/2	6	
M	3	0	3s	0	±1/2	2	
		1	3p	-1 0 +1	±1/2	6 18	
		2	3d	-2 -1 0 +1 +2	+1/2	10	
N	4	0	4s	0	±1/2	2	
		1	4p	-1 0 +1	+1/2	6 32	
		2	4d	-2 -1 0 +1 +2	± 1/2	10 32	
		3	4f	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	±1/2	14	

3. Chemische Bindungstypen

3.1 Kovalente Bindungen

Zwei Atome teilen sich ein Elektronenpaar. Bsp.:

Oktettregel: #Bindungen =8-#VE

Nur für Elemente der 1. & 2. Hauptgruppe gilt Oktettregel strikt. Ab dritten HG können Elemente auch mehr Bindungen eingehen. !Bei H und He \rightarrow #Bindungen = 2 - #VE

3.2 Polarität & Dipolmoment

- ΔEN < 0.5: Gleichmässige Verteilung der Elektronen zwischen Atomen, kein Dipolmoment.
- $\Delta EN > 0.5$: Polare Bindung, e^- näher beim elektronegativen Atom (δ^-). Ungleichmässige Verteilung der Elektronen \rightarrow Dipolmo-

3.3 Formalladung

Wenn ein Atom mehr/weniger Bindungen macht, als nötig sind um ein VE-Oktett zu erreichen, resultiert eine Formalladung auf den Atom. Bestimmung der Formalladung:

- 1. Alle Bindungen im Molekül spalten (gleichmässige Aufteilung zwischen Bindungspartnern.)
- 2. Formalladung je Atom = $\#VE \#e^-$ (nach Spaltung)
- 3. Formalladungen aufsummieren → effektive Ladung des Moleküls.
- 4. Homolytische Spaltung: Bindung gleichmässig in der Mitte trennen

3.4 Bindungslänge & Bindungsstärke

Länge: Dreifach < Doppelt < Einfach Stärke: Dreifach > Doppelt > Einfach Ein Molekül ist am stabilsten, wenn:

- · am wenigsten Formalladungen.
- · Formalladung nicht zu vermeiden sind, wenn geringste Ladungstrennung auftritt.
- negative (positive) Formalladungen auf elektronegativen (-positiven)

3.5 Ionische Bindung

Ein Atom gibt einem anderen Atom Elektronen ab → Kationen(+) und Anionen(-) entstehen. Bindung durch elektrostatische Anziehung, Ionische Bindung erst ab $\Delta EN > 1.7$

Atom mit niedrigerer EN gibt Elektron ab ↔.

Die freiwerdende Energie, wenn sich Anion & Kation im Gitter anordnen nennt man : ΔH_{Gitter}

3.6 Metallische Bindung



Positiv geladene Kerne umgeben von einer negativ geladenen Elektronenwolke. Metalle haben Defizit an VE → zu wenig VE, um Kovalente Bindung einzugehen. Frei bewegliche Ladungen (Elektronenwolke) sind Ursache für gute Strom- und Wärmeleitfähigkeit.

4 Molekiilmodelle

4.1 VSEPR

Bestimmung des Modells:

- 1. Zentralatom des Moleküls bestimmt.
- 2. Anzahl Liganden Bestimmen
- 3. Bestimmung der freien Elektronenpaare → Tabelle

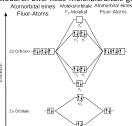
Bindungsordnung (BO)= $0, 5 \cdot (\# e^{-}$ in bindenden MO $- \# e^{-}$ in anti-bindenden MO) Je

höher RΩ desto stabiler das System, stärker Bindung und kürzer die Bindung.

Number of	Electron-	Molecular Geometry				
Electron Dense Areas	Pair Geometry	No Lone Pairs	1 Ione Pair	2 Ione Pairs	3 Ione Pairs	4 Ione Pairs
2	Linear 180°	Linear				
3	Trigonal planar 120°	Trigonal planar	Bent			
4	Tetrahedral	Tetrahedral	Trigonal pyramidal	Bent		
5	Trigonal bipyramidal 120°/90°	Trigonal bipyramidal	Sawhorse	T-shaped	Linear	
6	Octahedral 90°	Octahedral	Square pyramidal	Square planar	T-shaped	Linear

4.2 Molekül-Orbital-Modell

Bindung entsteht durch das Überlappen der Atomorbitale zweier Atome wodurch zwei neue Molekülorbitale gebildet werden.



 σ -Bindung: Atomorbitale überlappen entlang der internuklearen Achse.

 π -Bindung: Atomorbitale überlappen parallel zur internuklearen Achse.

Diagramm von unten nach oben auffüllen. Mit * markierte Orbitale sind antibindend.

Ferromagnetische Eigenschaften von Molekülen:

Paramagnetisch: Das Molekül hat ungepaarte Elektronen und wird daher von einem Magnetfeld angezogen.

Diamagnetisch: Das Molekül hat keine ungepaarten Elektronen und wird daher von einem Magnetfeld leicht abgestossen.

1 Pfeil in Box → Paramagnetisch, sonst Diamagnetisch

4.3 Hybridisierung

Verschmelzen von verschiedenen Orbitalen in einem Molekül.

- Bei der sp-Hybridisierung verschmelzen ein s- und ein p-Orbital miteinander. Bsp.: ethin (HC≡CH)
- Bei der sp^2 -Hybridisierung kommt zu einer Hybridisierung eines s-Orbitals und zwei p-Orbitalen. Bsp.: Ethen (H2C=CH2)
- Bei der sp³-Hybridisierung verbindet sich ein kugelförmiges s- und drei hantelförmige p-Orbitale, Bsp.: Methan(CH4)

Bei sp-Hybridiserung:



sp-Hybridorbitale

Bei sp²-Hybridiserung:



Bei sp³-Hybridiserung:



5. Aggregatszustände

5.1 Intermolekulare Wechselwirkungen

- 1. Wasserstoffbrücken (stark) Entstehen zwischen H und O. N. F Atomen
- 2. Dipol-Dipol-Wechselwirkungen (mittel) Entstehen durch polare Bindungen ($\Delta EN > 0.5$)
- 3. Van-der-Waals-WW/Dispersionskräfte (schwach) Entstehen durch temporäre Fluktuationen der Elektronen → temporärer Dipol, Gibts es immer. Grosse und lange Moleküle haben die stärksten Dispersionskräfte.

5.2 Flüssigkeiten

Gefrierpunktserniedrigung: $\Delta T_f = K_f m$

 $K_f = \text{Kryoskopische Konst.} \ m = \text{Molalität} \ \left| \frac{mol}{ka} \right|$

Je tiefer die Viskosität, desto grösser die Mobilität der Moleküle. Viskosität proportional zur Stärke der WW. Je höher die Viskosität, desto dickflüssiger.

5.3 Ideale Gase

- Wir machen 2 Annahmen:
- Gasteilchen wechselwirken nicht.
- Gasteilchen haben kein Volumen.
- Ideales Gasgesetz: pV = nRT = NkT
- Dichte $\rho = M \frac{n}{V} = M \frac{p}{RT}$
- R ist die universelle Gaskonstante
- Quadr. Mittelwert der Geschwindigkeit der Gasmoleküle: $u_{rms} = \sqrt{3RT/M}$
- $M\left[gmol^{-1}\right], d\left[gL^{-1}\right], V\left[L\right]$

Bei hohen Drücken verhalten sich Gase nicht mehr ideal → korrigierte

$$(p + \frac{n^2 A}{V^2})(V - nb) = nRT$$

Partialdruck: Der Partialdruck ist der Anteil eines Gases am Druck des betrachteten Gasgemisches. Partialdrücke einer Gasmischung sind immer kleiner als der Gesamtdruck

 $p_i = n_i \cdot \frac{RT}{V}$ Gesamtdruck = Σ aller Partialdrücke

5.4 Osmotischer Druck

Der Druck der benötigt würde, um Fluss von Lösungsmittelteilchen zu unterdrücken heisst osmotischer Druck.

$$\Pi = \left(\frac{n}{V}\right)RT = MRT \quad M = \text{Molarität}$$

6. Thermodynamik

6.2 0. Haupsatz

- Sind 2 Systeme wärmeleitend verbunden, dann haben beide Systeme die gleiche Temperatur. Thermisches Gleichgewicht.
- Wenn drittes System mit den anderen Systemen wärmeleitend verbunden ist → drittes System hat gleiche Temperatur.

6.2 1. Haupsatz

- Energie kann weder aus dem Nichts erzeugt werden, noch kann sie vernichtet werden Energieerhaltung.
- Energie kann von einem System nur mit der Umgebung mittels Wärme oder Arbeit ausgetauscht werden.
- Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik verbindet die innere Energie eines Systems mit der am System/vom System verrichteten Arbeit und der aufgenommenen/abgegebenen Wärme:

$$\Delta U = \Delta W + \Delta Q$$

$$\Delta E < 0$$
 avergen

 $\Delta E < 0 \rightarrow$ exergon, $\Delta E > 0 \rightarrow$ endergon Q = Wärme W = Arbeit U = Innere Energie (manchemal E)

6.3 2. Hauptsatz

Entropie: Mass an Unordnung. Ist eine Zustandsfunktion

- irreversibler Prozess: $\Delta S > 0$, reversibler Prozess $\Delta S = 0$
- Die Entropie nimmt immer zu.

$$\Delta S = \frac{q_{rev}}{T} = S_{Ende} - S_{Anfang}$$

$$\Delta S = nR \cdot \ln \left(\frac{V_{Ende}}{V_{Anfang}} \right)$$

 $q_{rev} = \text{Wärmemenge bei reversiblem Prozess}$

6.5 Gibbs Energie ΔG

$$\begin{array}{l} \Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \\ \Delta G_{rxn} = \Delta G_{Produkte} - \Delta G_{Edukte} \\ \Delta G_f^o = 0 \text{ für Elemente} \end{array}$$

• Spontan: $\Delta G < 0$, Nicht spontan: $\Delta G > 0$

ΔH	ΔS	$-T\Delta H$	ΔG	Reaktion Char.
-	+	-	1	Spontan bei allen T
+	-	+	+	Nicht spontan
-	-	+	+/-	Spontan bei low T, Nicht spontan bei high T
+	+	-	+/-	Spontan bei high T, Nicht spontan bei low T

6.4 Enthalpie ΔH

Bei konstantem Druck aufgenommenen/ abgegebenen Wärmemenge $\Delta H = \Delta E + p\Delta V = (q_p + w) - w = q_p$

- 1. Endotherm: $\Delta H > 0$ (System nimmt Wärme auf)
- 2. Exotherm: $\Delta H < 0$ (System gibt Wärme ab)

Reaktionsenthalpie:

 $\Delta H = \Delta H_{Produkte} - \Delta_{Edukte}$

Bildungsenthalpie:

$$\begin{array}{l} \Delta H_f = \sum n \cdot H_f(Produkte) - \sum m \cdot H_f(Edukte) \\ n, m = \text{Anzahl Moleküle} \end{array}$$

Falls Edukt/Produkt nur 1 Element $\rightarrow H_f = 0$

Intensive Zustandsgrößen: Druck, absolute Temperatur Extensive Zustandsgrößen: Volumen, Stoffmenge, Entropie

Thermodynamische Potentiale (Zustandsgröße): innere Energie, freie Energie, Enthalpie, Gibbs-Energie

Prozessgrößen: Wärme, Arbeit

Satz von Hess: $\Delta H_{rxn} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \cdots + \Delta H_n$

7. Kinetik

7.1 Reaktionsgeschwindigkeit

$$-aV - bB - (\dots) + cC + dD + (\dots) = 0$$

Reaktionsgesetz:
$$r=\frac{1}{\nu}\frac{d\left[X_{i}\right]}{dt}=k\prod_{i=1}\left[N_{i}\right]^{\left|\nu_{i}\right|}$$
 (1)

 ν = Stöchiometrischer Koeffizient, für Edukte + für Produkte $k = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$ A=Frequenzfak., E_a =Aktivierungsenergie, k = Geschwindigkeitskoeffizient.

Bestimmung der reaktionsgeschwindigkeit an Bildungsgeschwindigkeit 1. Schauen, von welchem Molekül Geschwindigkeit gefragt, von welchem

- 2. Koeffizienten der betroffenen Moleküle merken
- 3. In 1 einsetzen und nach gesuchter Geschwindigkeit auflösen

7.2 Reaktionsordnung

Reaktionsordnung bezüglich eines Edukts = Betrag seines stöch. Koeffizienten. Gesamtordnung = Summe aller Ordnungen der Edukte.

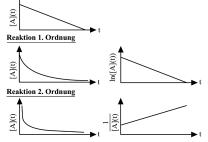
$$\begin{array}{l} \text{Bsp.. NH}_4{}^+ + \text{NO}_2{}^- \longrightarrow \text{N}_2 + 2\,\text{H}_2\text{O mit} \\ \text{Geschwindigkeitsgesetz: } r = k \Big[\text{NH}_4{}^+ \Big]^1 \Big[\text{NO}_2{}^- \Big]^1 \end{array}$$

$$m_{NH_{A}^{+}}^{+} = 1; \quad m_{NO_{2}^{-}}^{-} = 1; \quad m_{N_{2}}^{-} = 0; \quad m_{H_{2}O}^{-} = 0$$

Gesamtordnung der Reaktion ist: $m_{tot} = \sum m_i = 2$

- 0. Ordnung: konzentrationsunabhängig
- 1. Ordnung: Abhängig von Konzentration 1 Reaktanten
- 2. Ordnung: Abhängig von Konzentration 2 Reaktanten

Reaktion 0. Ordnung



A → Produkte $r = -\frac{d[A]}{dt} = k$ $[A]_t = -kt + [A]_0$ $t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$

A → Produkte $=-\frac{d[A]}{dt}=k[A]$ $[\mathsf{A}]_\mathsf{t} = [\mathsf{A}]_0 \mathrm{e}^{-\mathsf{k}\mathsf{t}}$ $t_{1/2} = \frac{\ln{(2)}}{k} = \frac{0.693}{k}$ A → Produkte

 $r = -\frac{1}{2} \cdot \frac{d[A]}{dt} = k[A]^2$ $\frac{1}{[A]_t} = 2kt + \frac{1}{[A]_0}$

7.3 Molekularität einer Reaktion

Anzahl der an Elementarreaktionen teilnehmenden Molekülen.

Elementarreaktion: Einzelner, irreversibel Schritt.

Unimolekular: A --- Produkten Bimolekular: A + B → Produkten

Trimolekular: 2A + B → Produkten

Mehrstufige reaktion: Reaktion aus mehreren Elementarreaktion Bsp.:

$$NO_2 + CO \longrightarrow NO + CO_2 \longrightarrow \frac{2 \text{ NO}_2 \longrightarrow NO_3 + NO}{NO_3 + CO \longrightarrow NO_2 + CO_2}$$

Geschwindigkeitsgebender Schritt: Einzelne Elementarreaktionen oftmals nicht gleich schnell -> Geschwindigkeit annäherbar durch Geschwindigkeit des langsamsten Schritts.

Reaktions und Geschwindigkeitsgesetz bestimmen:

- 1. Alle Gleichungen addieren, Gleiches kürzen → Reaktion
- 2. Produkte langsamster reaktion → Geschwindigkeitsgesetz

Qualitative Temperaturabhängigkeit von k:

Die Erhöhung der Temperatur um $10^{\circ}C$ hat eine Verdoppelung der reaktionsgeschwindigkeit r bzw. des Geschwindigkeitskoeffizient k

Qualitative Temperaturabhängigkeit von k:

$$k(T) = A \cdot \exp(-\frac{E_a}{RT}) \quad \ln(k(T)) = -\frac{E_a}{RT} + \ln(A)$$

8. Säure und Basen

Allgemein

Für die Reaktion $aA + bB \subseteq cC + dD$

$$K = \frac{k \text{_}Hin}{k \text{_}R\ddot{u}ck} = \frac{[Produkte]}{[Edukte]} = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b}$$

 $K \gg 1 \rightarrow \text{GGW rechts}$ $K \ll 1 \rightarrow \text{GGW links}$

8.1 Prinzip von le Châtélier

- Konzentrationsänderung: Erhöhung der Reaktanten führt zu Beschleunigung der Hin-Reaktion
- Druckänderung: Wird Druck in System erhöht → GGW verschiebt sich in Richtung Seite mit weniger teilchen.
- Temperaturänderung: Endotherme Reaktion wird bei Erhöhung bevorzugt.

8.2 Brönsted-Definition

S-B-Reaktion GGW- $HCI + H_2O \rightleftharpoons CI^- + H_3O^+$ sind Reaktionen. Säure 1 Base 2 Base 1 Säure 2 Säuren geben H⁺ ab

- (Protonendonatoren). Basen nehmen H⁺ auf
- (Protonenakzeptoren).
- Schwache Säure: $K \ll 1$ GGW bei HA• Starke Säure: $K\gg 1$

Base 1 Säure 2 Säure 1 Base 2 $HA + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^ K_s = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]}$

 $NH_3 + H_2O \rightleftharpoons NH_4^* + OH^-$

GGW bei $A^$ $pH = -\lg([H_3O^+]), \ pOH = -\lg([OH^-])$ 14 = pOH + pH

8.3 PH-Skala $pK_S = -\log K_S$

$\qquad \qquad \textbf{Saure Lsg. pH-Wert} < 7$

- Basische Lsg. pH-Wert > 7
- hoher $K_S \to \text{starke S\"aure}$
- tiefer $K_S^{\sim} \rightarrow$ starke Base pH-Wert bestimmen: $pH = -\log(c([S\ddot{a}ure])) = 14 - pOH$

8.4 Redoxreaktion

Allgemeines

- · Reaktion bei welcher Elektronen zwischen reaktionspartnern ausgetausch werden
- Oxidation: Abgabe von e^- , Oxidationszahl wird erhöht (Reduktionsmittel wird oxidiert)
- Reduktion: Annahme von e⁻, Oxidationszahl wird gesenkt (Oxidationsmittel wird reduziert).

Oxidationszahl: # VE eines Atoms-#Elektronen verbleibend am Atom nach heterolytischer Spaltung:

$$\begin{array}{c} \text{Oxidation: } -2e^{-} \\ \downarrow 0 \\ 2 \operatorname{Na} + \operatorname{Cl}_2 \longrightarrow \operatorname{Na}^+ + 2 \operatorname{Cl} \\ \downarrow \\ \operatorname{Reduktion: } +2e^{-} \end{array}$$

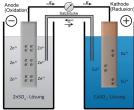
8.5 Heterolytische Spaltung

Beispie.

- 1. Gesamtladung = Summe der Oxidationszahlen.
- 2. Homonukleare Moleküle An haben die Oxidationszahl
- 3. Bei einatimigen Ionen: Ladung = Oxidationszahl.
- Wasserstoff am Metall → Hydrid (-I)
- 5. Wasserstoff am Nichtmetall \rightarrow Proton (+I)
- 6. Sauerstoff oft -II
- 7. Fluor immer –I, da elektronegativestes Element

Oxidationsmittel: Stoff, welcher andere Stoffe oxidiert und dabei selbst reduziert wird, da er gerne Elektronen aufnimmt. Reduktionsmittel: Stoff, welcher andere Stoffe reduziert und dabei selbst oxidiert wird, da er gerne Elektronen abgibt.

8.6 Galvanische Zelle



e fliessen von der Anode zur Kathode. Anode gibt e ab. Kathode nimmt e auf. Oxidation an Anode. Reduktion an Kathode.

Überschüssige Sulfationen wandern über salzbrücke zurück → Ladungsausgleich.

Die Zellspannung E_{zelle} gibt Unterschied zwischen den Elektrodenpotentialen wieder. Der Unterschied in diesem Potential ist die EMK. Zellspannung in Volt. $E_{Zelle} = E_{Red}(Kat.) - E_{Red}(Ano.) = E_{Red}(Red) - E_{Red}(Ox)$